

História da teoria atômica

A ideia de que a matéria é feita de unidades discretas é antiga, mas a teoria atômica moderna nasce quando essa ideia deixa de ser um palpite filosófico e passa a ser um programa quantitativo, apoiado por medições e por modelos capazes de prever resultados. A história da teoria atômica é, por isso, a história de uma sucessão de “retratos” do átomo: cada retrato resolve anomalias do anterior, mas introduz novos conceitos (carga, quantização, probabilidade) que obrigam a mudar a linguagem e, por vezes, o que se entende por “estrutura”.

Na Antiguidade, Leucipo e Demócrito defenderam que toda a matéria seria composta por átomos indivisíveis a moverem-se no vazio; Aristóteles, pelo contrário, privilegiou uma visão contínua da matéria. Durante muitos séculos, a concepção contínua foi culturalmente dominante, e a noção atomista sobreviveu mais como intuição metafísica do que como ciência. A viragem começa a tornar-se inevitável quando a Química se torna quantitativa: as substâncias reagem segundo proporções bem definidas e repetíveis. No final do século XVIII, Lavoisier consolida a lei da conservação da massa (numa reacção química a massa total conserva-se), e Proust formula a lei das proporções definidas (um composto tem sempre a mesma composição em massa). Estas regularidades pedem uma explicação discreta: se a matéria fosse contínua, nada obrigaria as reacções a obedecer a “degraus” fixos de composição.

É neste contexto que John Dalton, no início do século XIX, propõe uma teoria atômica moderna: cada elemento é constituído por átomos idênticos entre si (para esse elemento), diferentes dos de outros elementos; os compostos formam-se pela combinação de átomos em proporções simples; e as reacções químicas reorganizam átomos, não os criam nem destroem. Dalton não conhecia electrões, prótons, nem núcleos; o seu átomo era, por assim dizer, o “tijolo químico” mínimo. Mesmo assim, a teoria de Dalton tem um poder extraordinário: encaixa naturalmente as leis estequiométricas e dá um quadro conceptual para compreender fórmulas químicas como relações discretas.

A segunda grande peça chega com a tabela periódica. Ao ordenar os elementos segundo propriedades químicas e massas atômicas, Mendeleev mostra que há periodicidade: certas propriedades reaparecem em intervalos

regulares. Isso sugere que a estrutura interna dos átomos muda de modo sistemático ao longo dos elementos. A periodicidade torna-se, mais tarde, uma pista decisiva para a estrutura electrónica.

A passagem do átomo “tijolo” para o átomo “sistema físico” acelera no fim do século XIX e início do século XX, com a electricidade e a radiação. J. J. Thomson descobre o electrão (1897) ao estudar raios catódicos: conclui que há partículas com carga negativa e massa muito menor do que a de um átomo. O átomo, afinal, é divisível e contém componentes. Thomson propõe então o modelo do “pudim de passas”: uma esfera de carga positiva difusa com electrões incrustados, de modo a dar neutralidade eléctrica global. Este modelo tenta compatibilizar a neutralidade do átomo com a existência de cargas negativas internas.

Mas a estrutura positiva difusa não resiste à experiência decisiva de Rutherford (Geiger e Marsden) com partículas alfa (1909–1911): ao bombardear uma fina folha metálica, observa-se que a maior parte das partículas atravessa quase sem desvio, mas uma pequena fracção sofre desvios grandes, até retroespalhamento. A interpretação é inevitável: a carga positiva e quase toda a massa do átomo estão concentradas numa região minúscula — o núcleo — e o resto do átomo é, em grande parte, vazio. Nasce o modelo nuclear do átomo: electrões em torno de um núcleo compacto e positivo. É um salto conceptual: o átomo não é uma “bolha” com carga espalhada; é um sistema com escalas muito diferentes (um núcleo com raio típico $\sim 10^{-15}$ m, um átomo com raio típico $\sim 10^{-10}$ m).

Esta imagem, porém, cria um problema fatal quando se aplica a física clássica. Se um electrão orbitar um núcleo como um planeta orbita o Sol, estará acelerado (movimento circular implica aceleração centrípeta). Na electrodinâmica clássica, cargas aceleradas emitem radiação electromagnética, perdendo energia. Resultado: o electrão deveria espiralar para o núcleo em fracções de segundo, e os átomos seriam instáveis. Além disso, a radiação emitida seria contínua em frequência, enquanto os espectros atómicos observados (linhas espectrais discretas) mostram frequências bem definidas. A estabilidade do átomo e os espectros de linhas obrigam a uma ruptura com o contínuo clássico.

Antes de Bohr, há um passo crucial: a quantização proposta por Planck (1900) para resolver o problema da radiação do corpo negro. Planck

introduz a ideia de que a energia trocada por osciladores microscópicos ocorre em “quanta” proporcionais à frequência ($E = h f$). Poucos anos depois, Einstein usa a quantização para explicar o efeito fotoelétrico (1905), tratando a luz como constituída por quanta (fótons) com energia $h f$. Estes resultados não são ainda uma teoria atômica, mas introduzem o ingrediente que faltava: há processos microscópicos que não aceitam qualquer valor de energia, apenas valores discretos.

O modelo de Bohr (1913) é a primeira síntese poderosa entre núcleo rutherfordiano e quantização. Bohr parte do átomo de hidrogénio (um electrão, um núcleo com carga $+e$) e impõe postulados que contradizem deliberadamente a física clássica, mas que reproduzem os espectros:

Existem órbitas estacionárias permitidas para o electrão nas quais ele não irradia energia, apesar de estar acelerado.

A radiação é emitida ou absorvida apenas quando o electrão transita entre órbitas estacionárias; a frequência do fóton satisfaz $h f = |E_i - E_f|$.

A quantização das órbitas é imposta por uma condição no momento angular: $L = m v r = n \hbar$, onde n é um número inteiro positivo e $\hbar = h/(2\pi)$.

Com estes postulados, Bohr calcula os raios permitidos e as energias. Para o hidrogénio, obtém-se que os níveis de energia são negativos (estados ligados) e seguem uma lei simples: $E_n \propto -1/n^2$. O raio da órbita fundamental ($n=1$) surge como uma escala natural, o raio de Bohr a_0 . Mais importante: ao permitir transições entre níveis, Bohr prevê as frequências das linhas espectrais e reproduz a fórmula empírica de Rydberg para o hidrogénio. Aqui está o triunfo: um modelo atômico que explica quantitativamente por que razão o espectro é discreto.

Mas o modelo de Bohr tem limites claros, que são tão instrutivos quanto os seus sucessos. Funciona muito bem para sistemas “hidrogenóides” (um electrão em torno de um núcleo: H, He $^+$, Li $^{2+}$, etc.), mas falha quando se tenta descrever átomos com vários electrões, intensidades relativas das linhas, estrutura fina, efeitos do spin, e detalhes espectrais que exigem uma física mais profunda. Além disso, a condição $L = n \hbar$ é imposta “à força”, não derivada de princípios mais gerais. E o próprio conceito de órbita

definida entra em conflito com a natureza ondulatória que a matéria começa a revelar.

Essa natureza ondulatória é antecipada por de Broglie (1924): se a luz, que era tida como onda, tem aspectos corpusculares (fotões), talvez a matéria, tida como corpuscular, tenha aspectos ondulatórios. De Broglie propõe um comprimento de onda associado a uma partícula com momento p : $\lambda = h/p$. Esta ideia dá uma intuição nova para a quantização: órbitas permitidas poderiam corresponder a ondas estacionárias ao longo da circunferência (um número inteiro de comprimentos de onda “cabe” na órbita). Pouco depois, a difracção de electrões observada experimentalmente confirma que electrões se comportam como ondas em certas condições.

A mecânica quântica moderna nasce em meados da década de 1920 com duas formulações inicialmente distintas, mas equivalentes: a mecânica matricial (Heisenberg) e a mecânica ondulatória (Schrödinger). Para a história da teoria atómica — e, em particular, para compreender “estrutura atómica” em termos modernos — a formulação de Schrödinger é central porque substitui a órbita por um objecto matemático que codifica probabilidades: a função de onda.

No modelo quântico de Schrödinger, o estado de um electrão num átomo é descrito por uma função de onda $\psi(r, t)$. Esta função não é, em geral, observável directamente; o que tem significado físico é $|\psi|^2$, interpretado (na interpretação de Born) como densidade de probabilidade de encontrar o electrão numa dada região do espaço. Esta mudança é profunda: em vez de dizer “o electrão está nesta trajectória”, diz-se “o electrão pode ser encontrado aqui com esta probabilidade”. O átomo deixa de ser um sistema planetário e passa a ser um sistema de distribuições espaciais quantizadas.

A equação de Schrödinger (dependente do tempo) governa a evolução de ψ . Para estados estacionários (energias definidas), usa-se a equação independente do tempo, que é um problema de autovalores: o operador Hamiltoniano (energia total) actuando sobre ψ devolve $E \psi$. Para o átomo de hidrogénio, o potencial electrostático é o de Coulomb, $V(r) \propto -1/r$. Resolver a equação de Schrödinger neste potencial conduz, de forma natural e sem postulados ad hoc sobre órbitas, aos mesmos níveis de energia de Bohr: $E_n \propto -1/n^2$. Ou seja: Bohr “acertou” nos níveis porque,

para o hidrogénio, a estrutura energética é uma consequência da ondulatória quântica no potencial coulombiano.

Contudo, Schrödinger oferece muito mais do que energias. A solução do hidrogénio produz funções de onda com uma estrutura angular e radial bem definida, e isso introduz os números quânticos:

n (número quântico principal): determina a energia e , grosso modo, o “tamanho” do orbital.

l (número quântico azimutal ou orbital): relacionado com o momento angular orbital; define o tipo de orbital (s, p, d, f correspondem a $l = 0, 1, 2, 3, \dots$).

m (número quântico magnético): projecção do momento angular numa direcção escolhida; assume valores inteiros de $-l$ a $+l$.

(mais tarde, com a incorporação do spin, surge $m_s = \pm 1/2$, mas isso já ultrapassa o modelo puramente de Schrödinger e requer a mecânica quântica com spin de Pauli/Dirac; ainda assim, é essencial para a estrutura electrónica real).

Os “orbitais” (s, p, d, f) não são órbitas; são padrões espaciais de probabilidade. Um orbital s é esfericamente simétrico; orbitais p têm duas “lobas” opostas; orbitais d e f têm geometrias mais complexas. A forma e orientação destes orbitais explicam, de modo directo, fenómenos químicos como direcionalidade de ligações, hibridação e geometria molecular, coisas que o modelo de Bohr não podia sequer formular.

A quantização deixa de ser um conjunto de restrições impostas e passa a emergir da matemática: ao exigir que ψ seja finita, normalizável (probabilidade total 1) e bem comportada, obtêm-se apenas certas soluções permitidas — e, portanto, apenas certos valores de energia e de momento angular. A discretização é consequência das condições físicas sobre a função de onda.

Outra peça crucial da “estrutura” moderna é o princípio da incerteza de Heisenberg: não é possível conhecer simultaneamente, com precisão arbitrária, pares conjugados como posição e momento. Isto não é um defeito instrumental, é uma propriedade estrutural: um electrão ligado num

átomo não pode ter posição e momento definidos como num planeta. Isso reforça a ideia de que trajetórias clássicas não são o objecto correcto.

Até aqui, “estrutura atómica” tem sido sobretudo estrutura electrónica em torno de um núcleo. Mas a história da teoria atómica é também, inevitavelmente, a história da estrutura nuclear, porque o núcleo não é apenas um ponto carregado: tem composição, forças internas e processos próprios.

Após Rutherford, torna-se claro que o núcleo contém carga positiva. Durante algum tempo, imaginou-se que essa carga pudesse ser explicada por prótons e electrões dentro do núcleo, mas isso criava inconsistências (por exemplo, com spins e estatística). A descoberta do neutrão por Chadwick (1932) resolve a questão: o núcleo é composto por prótons (carga $+e$) e neutrões (carga 0), colectivamente chamados nucleões. O número de prótons (Z) define o elemento químico; o número total de nucleões ($A = Z + N$) define o isótopo. Esta distinção explica por que razão há átomos do mesmo elemento com massas diferentes (isótopos): têm o mesmo Z , mas N diferente.

A estrutura nuclear introduz também uma nova força fundamental efectiva à escala nuclear: a força nuclear forte (residual), que mantém prótons e neutrões ligados apesar da repulsão eléctrica entre prótons. Esta força é de curto alcance (actua a distâncias da ordem de femtómetros) e é muito mais intensa do que a força electromagnética a essa escala. A competição entre a atracção nuclear de curto alcance e a repulsão coulombiana de longo alcance ajuda a compreender por que certos núcleos são estáveis e outros radioactivos, e por que núcleos muito pesados tendem a fissão.

A radioactividade, descoberta por Becquerel e estudada por Marie e Pierre Curie, ganha explicação mais clara quando se entende que alguns núcleos são instáveis e decaem espontaneamente. Há três tipos clássicos: alfa (emissão de um núcleo de hélio, 2 prótons e 2 neutrões), beta (transformações que envolvem neutrões e prótons com emissão de electrões/positrões e neutrinos) e gama (emissão de fótons de alta energia quando o núcleo transita entre estados excitados). A radioactividade mostra que o núcleo tem níveis de energia próprios (estados nucleares), análogos em espírito aos níveis electrónicos, embora governados por uma física e escalas de energia muito diferentes.

A unificação conceptual do “atómico” e do “nuclear” torna-se dramaticamente evidente com a fissão (descoberta e interpretada em 1938–39) e, pouco depois, com a energia nuclear controlada e as armas nucleares. A fissão mostra que a reorganização do núcleo pode libertar energia enorme, porque a diferença de energia de ligação nuclear por nucleão entre núcleos pesados e núcleos de massa intermédia pode ser convertida em energia cinética e radiação. Do lado oposto, a fusão em núcleos leves (como no Sol) liberta energia ao aproximar núcleos até a força forte “capturar” os nucleões em configurações mais ligadas. Assim, a teoria atómica amadurece para além da química: o átomo tem um núcleo cuja física explica fenómenos astrofísicos e tecnológicos.

Voltando aos modelos de Bohr e Schrödinger, é útil perceber o que cada um representa na evolução histórica e pedagógica. Bohr é um modelo de transição: ainda fala de órbitas e intui um átomo semi-clássico, mas introduz a quantização como regra estrutural. A sua grande virtude é mostrar que a quantização não é um pormenor — é a chave para a estabilidade e para os espectros. Schrödinger, por sua vez, substitui o “desenho mecânico” do átomo por uma descrição matemática em termos de estados, operadores e probabilidades. O electrão já não é uma partícula em órbita, mas um sistema quântico com distribuição espacial descrita por um orbital. As propriedades observáveis (energias, momentos angulares, transições) emergem como resultados de autovalores e de regras de selecção (quando se aprofunda o tratamento da interacção com a radiação).

Na linguagem moderna, a estrutura atómica é entendida, primeiro, como estrutura electrónica: electrões ocupam estados quantizados num potencial aproximadamente central do núcleo, modificados por repulsões electrão–electrão em átomos polieletrónicos. A ordem de preenchimento de orbitais (com regras como Aufbau, exclusão de Pauli e regra de Hund) explica a periodicidade da tabela periódica, as valências e grande parte da química. Em paralelo, a estrutura nuclear é entendida como organização de prótons e neutrões em estados nucleares quantizados, com energias de ligação e decaimentos característicos, governados por interacções fortes e fracas. As duas estruturas acoplam-se em fenómenos como isótopos (química quase igual, massa e estabilidade diferentes) e espectros hiperfinos (interacções entre momentos magnéticos do núcleo e dos electrões).

A história da teoria atómica, portanto, não é uma linha recta, mas uma sequência de substituições conceptuais: do átomo indivisível filosófico ao átomo químico de Dalton; do átomo “com electrões” de Thomson ao átomo nuclear de Rutherford; do átomo planetário instável ao átomo quantizado de Bohr; e do átomo quantizado por postulados ao átomo quântico de Schrödinger, onde quantização e formas espaciais emergem de uma teoria ondulatória. A partir daí, a física continua: o spin, o princípio de exclusão, a equação de Dirac e a electrodinâmica quântica refinam o retrato, e a física nuclear desenvolve modelos próprios (camadas nucleares, forças efectivas, quarks e gluões a níveis mais fundamentais). Mas o arco essencial está feito: a matéria comum, nas suas propriedades químicas e espectrais, depende directamente da quantização electrónica; e a estabilidade e transformação dos elementos dependem da estrutura nuclear.